

Chapitre 1

Propriétés des semiconducteurs

1.1 Introduction à la physique du solide

1.1.1 Problématique

- La physique du solide nous apprend que l'on peut distinguer deux types de solide :
- ceux pour lesquels l'arrangement atomique est aléatoire. De tels solides sont qualifiés de "amorphes". C'est par exemple le cas des verres.
 - ceux pour lesquels l'arrangement atomique est périodique : ce sont les cristaux. C'est le cas des semiconducteurs, qui nous intéressent plus particulièrement dans ce cours.

Le but de ce chapitre est de présenter les propriétés électroniques essentielles des matériaux couramment utilisés dans les composants électroniques usuels (diodes sous toutes les formes, transistors, capteurs), afin de justifier le fonctionnement interne des dispositifs. Nous donnerons les résultats essentiels, sans les justifier, afin de simplifier ce cours.

Considérons un électron issu d'un tel matériau. Afin de modéliser les caractéristiques électriques de ce matériau, il faut savoir déterminer l'énergie ou le potentiel de cet électron. Si on ne considère qu'un atome, la physique atomique, et entre autre la mécanique quantique, nous permettent de connaître cette énergie et ce potentiel. On sait alors que les électrons ont des niveaux d'énergie quantifiés (orbitales atomiques). Mais dans un cristal, l'atome n'est pas isolé. Le problème devient alors plus complexe. Connaissant toutes les interactions ¹ que subit cet électron avec les atomes et avec les autres électrons du matériau, il suffirait de résoudre autant d'équations de Schrödinger, couplées entre elles, que l'on a d'atomes et d'électrons dans notre matériau ... cette solution repose sur un principe simple sur le papier mais irréalisable en pratique en raison du trop grand nombre d'atomes.

Moyennant quelques approximations que nous ne détaillerons pas dans ce polycopié, la physique du solide, qui repose sur des calculs approchés en mécanique quantique, nous permettra de caractériser l'énergie des électrons dans des cristaux, au travers de la théorie des bandes. Une fois cette répartition des énergies données, nous pourrions alors étudier le comportement des matériaux, tout en s'affranchissant de ces problèmes de physique quantique.

¹essentiellement de type coulombiennes

1.1.2 Quelques rappels

Rappels d'atomistiques

	I	II		Ib	IIb	III	IV	V	VI	VI	VIII
1	H										He
2	Li	Be				B	C	N	O	F	Ne
3	Na	Mg				Al	Si	P	S	Cl	Ar
4	K	Ca	...	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5	Rb	Sr	...	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6	Cs	Ba	...	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn

FIG. 1.1 – Extrait du tableau périodique des éléments

La figure 1.1 représente le tableau périodique des éléments. On rappelle que le numéro de la colonne indique le nombre d'électrons présents sur la couche externe (couche de valence). Ces électrons de la couche de valence participent aux liaisons (covalentes) entre les atomes. Le numéro de la ligne indique le nombre de couches électroniques. Par exemple, le Silicium (Si) est situé dans la quatrième colonne et sur la deuxième ligne : il possède deux couches électroniques, dont 4 électrons sur la dernière (qui en comporte 8 au maximum ²).

Enfin, on rappelle que chaque atome est caractérisé par son numéro atomique A , qui correspond au nombre de protons, et son nombre de masses Z qui correspond à la somme du nombre de protons et de neutrons.

Lors de l'étude des dispositifs à semiconducteurs, nous considérerons des semiconducteurs constitués :

- d'un seul atome, essentiellement situés dans la colonne IV : Si (Silicium), Ge (Germanium), Sn ...
- de deux atomes (appelés composés binaires), les éléments appartenant typiquement aux colonnes III et V (composés dits III-V) ou IIb et VI (composés dits II-VI) : AlAs, GaAs, InSb, GaP, InP ...
- éventuellement de trois atomes (appelés composés ternaires), composés plus complexes, comme par exemple le composé HgCdTe.

Unités

L'ordre de grandeur des distances caractéristiques dans les solides que nous étudierons plus loin, est de quelques angstrom ($10^{-10} m$) : par exemple, le pas d'un réseau d'atome est d'environ 5 \AA dans les semiconducteurs courants. Les épaisseurs des matériaux, s'étendent en électronique de quelques 10 nm à plusieurs μm . Par

²le nombre maximum d'électrons par couche vaut $2n^2$, où n est le numéro de la couche atomique.

ailleurs, nous verrons que les phénomènes physiques caractéristiques des solides correspondent à des énergies de l'ordre de $10^{-19} J$. Le Joule est donc une unité mal adaptée à l'étude de la physique des solides (les grandeurs sont trop petites). Afin de simplifier la manipulation de ces grandeurs, les physiciens de la matière travaillent avec des énergies exprimées en électron-volt (symbole : eV). **1 eV correspond à l'énergie d'un électron accéléré sous une tension de 1 V.** Soit E_0 cette énergie (qui vaut donc 1 eV). En Joule, elle correspond à $E_0^{(J)} = q V = 1.6 \cdot 10^{-19} J$. Pour obtenir une énergie en eV , il suffit de diviser l'énergie exprimée en J par la charge élémentaire :

$$\boxed{E^{(eV)} = \frac{E^{(J)}}{q}} \quad (1.1)$$

Remarques :

1. Soit $k_B T$, l'énergie d'agitation thermique (k_B représente la constante de Boltzmann et T la température). C'est une énergie, donc exprimée en Joules. Par exemple, à température ambiante ($T = 300 K$) : $k_B T = 4.14 \cdot 10^{-23} J$. Pour l'exprimer en électron-volt, on divise (pour l'application numérique uniquement) $k_B T$ par la valeur de la charge élémentaire q . Mais on écrira, $k_B T = 0.0258 eV$. En revanche, le terme $k_B T/q$ désigne une tension. On écrira $k_B T/q = 0.025 V$. Mais ce dernier terme ne désigne pas une énergie (ce n'est pas homogène à une énergie, mais à une tension).
2. Les énergies de l'ordre de grandeur de l'électron-volt correspondent à des longueurs d'onde des photons du domaine optique et Infrarouge. Rappelons ici que l'énergie d'un photon vaut :

$$E = \frac{h c}{\lambda} \quad (1.2)$$

où h est la constante de Planck, c la vitesse de la lumière dans le vide et λ la longueur d'onde du photon. Afin d'avoir une énergie en électron-volt, il faut calculer le rapport $h c/q$, qui vaut : $1.24 \cdot 10^{-6} eV.m$. On retiendra que :

$$\boxed{E^{(eV)} = \frac{1.24}{\lambda(\mu m)}} \quad (1.3)$$

où $E^{(eV)}$ est l'énergie exprimée en électron-volt et $\lambda(\mu m)$ est la longueur d'onde en micromètre. Ainsi, une longueur d'onde de $1 \mu m$ (proche infrarouge) correspond à une énergie de $1.24 eV$.

1.1.3 Propriétés d'un cristal

Un cristal est caractérisé par un motif élémentaire ³ (appelé également maille élémentaire) qui se répète dans différentes directions de l'espace. La structure globale du cristal se déduit donc de ce motif par des translations selon des axes privilégiés du cristal. Ainsi, chaque point du réseau peut se reconstruire par translation de vecteur \vec{t} , à partir de trois vecteurs unitaires \vec{a}_i (correspondant aux trois axes du cristal) et de 3 entiers n_i :

$$\vec{t} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3, (n_1, n_2, n_3) \in \mathbb{Z} \quad (1.4)$$

³ce motif ne correspond pas à un atome, mais à un groupement d'atomes.

La figure 1.2 illustre un motif élémentaire périodique, au travers d'un dessin d'Escher. La maille élémentaire est constituée des 3 lézards de couleurs différentes. Cette structure comporte deux directions selon lesquelles la maille élémentaire se répète, ces directions étant portées par les vecteurs \vec{a}_1 et \vec{a}_2 .

Les figures 1.3 et 1.4 représentent la maille élémentaire du réseau cristallin du Silicium (Si) et de l'arséniure de gallium (GaAs). Elles sont constituées de plusieurs atomes de silicium ou de Ga et As.

La structure physique étant périodique, les électrons voient cette périodicité. Les principales grandeurs physiques associées (densité d'électrons, potentiel, énergie, fonctions d'onde) seront également périodiques. Ainsi, si n désigne une grandeur physique (la densité d'électrons par exemple) : $n(\vec{r} + \vec{t}) = n(\vec{r})$.

Cette grandeur est donc développable en série de Fourier. Plus généralement, on peut travailler dans l'espace de Fourier associé à l'espace métrique réel ⁴. A l'espace métrique réel (espace direct), qui est caractérisé par une unité de distance (le mètre), on associe l'espace de Fourier, appelé encore **espace réciproque** (ou indirect), qui est caractérisé par un vecteur d'onde ⁵ (en m^{-1}). Les grandeurs étant périodiques dans l'espace réel, les grandeurs associées dans l'espace de Fourier le seront aussi.

Prenons un exemple monodimensionnel d'un arrangement monoatomique (figure 1.5). La maille élémentaire est de période a dans l'espace direct. Ce nombre est appelé **paramètre de maille**. L'espace réciproque sera donc caractérisé par une périodicité des vecteurs d'onde, de période $k = 2\pi/a$. Rappelons en effet que la transformée de Fourier d'un peigne de Dirac est un peigne de Dirac.

Tout comme le réseau direct, on peut alors se restreindre pour le réseau réciproque à une période. En général, on considère la période centrale, comprise entre $-\frac{\pi}{a}$ et $+\frac{\pi}{a}$, appelée 1^{ère} zone de Brillouin.

⁴Dans le cas de l'étude des signaux temporels, il est souvent pratique de travailler dans l'espace de Fourier c'est à dire avec les fréquences. Il s'agit ici d'adopter le même type de raisonnement, à savoir travailler avec le vecteur d'onde \vec{k} qui est l'équivalent spatial de la fréquence temporelle.

⁵on rappelle que le vecteur d'onde permet d'avoir accès aux propriétés cinétiques : l'énergie cinétique d'une particule de masse m vaut $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. C'est donc un paramètre qui est important.

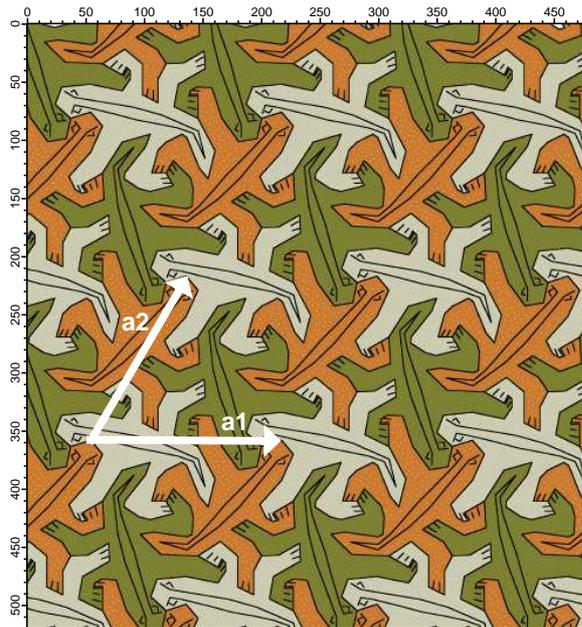


FIG. 1.2 – Structure périodique à deux dimensions, issue d'un dessin d'Escher.

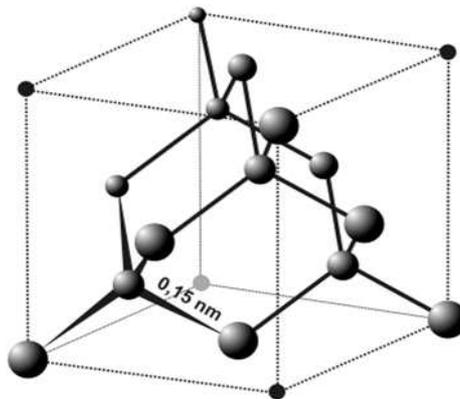


FIG. 1.3 – Maille élémentaire du silicium.

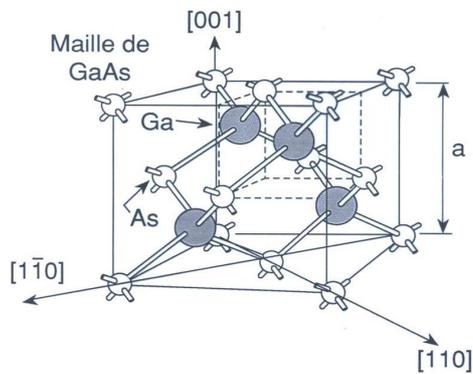


FIG. 1.4 – Maille élémentaire du GaAs.

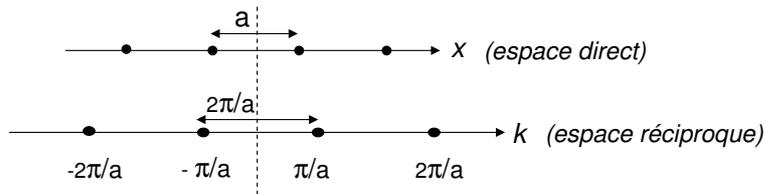


FIG. 1.5 – Espace direct et réciproque pour un cristal monodimensionnel et monoatomique

Ordres de grandeur :

- dans le cas du Silicium, le paramètre de maille vaut : $a = 5.43 \text{ \AA}$. La première zone de Brillouin s'étend donc de $k = -5.8 \cdot 10^9 \text{ m}^{-1}$ à $k = +5.8 \cdot 10^9 \text{ m}^{-1}$.
- dans le cas de l'arseniure de Gallium (GaAs), le paramètre de maille vaut : $a = 5.65 \text{ \AA}$. La première zone de Brillouin s'étend donc de $k = -5.56 \cdot 10^9 \text{ m}^{-1}$ à $k = +5.56 \cdot 10^9 \text{ m}^{-1}$.

Il est parfois utile d'avoir une idée de la quantité d'atomes présents dans les matériaux. On repère cette quantité par la densité d'atomes. Cette densité est généralement exprimée ⁶ en cm^{-3} .

Ordres de grandeur :

Les densités d'atomes du Silicium et du GaAs sont les suivantes :

$$N_{Si} = 5 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$$

$$N_{GaAs} = 4.4 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$$

1.1.4 Structure de bandes d'un semiconducteur

Description des bandes

Moyennant certaines approximations (non détaillées dans ce polycopié), on peut restreindre le problème à un unique électron soumis à un potentiel moyen. Une résolution numérique de l'équation de Schrödinger dans l'espace réciproque, permet alors de connaître l'évolution de l'énergie des électrons en fonction du vecteur d'onde \vec{k} : c'est le **diagramme des bandes d'énergie** ⁷. Ce diagramme fait apparaître 3 bandes d'énergies particulières :

⁶en physique du solide, les densités (d'atomes, de porteurs) sont très souvent exprimées en cm^{-3} et non en m^{-3} . Il faudra donc être très vigilant dans les applications numériques.

⁷La mécanique quantique nous apprend, dans le cas d'un atome isolé, que les électrons se répartissent sur des niveaux d'énergie discrets bien définis. En dehors de ces niveaux d'énergie, les électrons ne peuvent pas être présents. La présence d'un très grand nombre d'atomes va modifier cette répartition électronique : des niveaux continus d'énergie vont apparaître, étant issus des niveaux discrets des atomes isolés, ainsi que des bandes interdites.

- une bande de faibles énergies, appelée **bande de valence** (BV). Les électrons présents dans cette bande sont liés aux atomes et participent aux liaisons covalentes.
- une bande de plus hautes énergies, appelée **bande de conduction** (BC). Les électrons de cette bande sont libres de se déplacer (d'où le nom de conduction) : ils participent donc aux courants.
- une bande intermédiaire. C'est une **bande interdite**, c'est à dire qu'aucun électron ne peut se situer dans cette bande. L'énergie minimale séparant les deux bandes de conduction et de valence est appelée **énergie de gap**. Elle sera notée E_g .

Remarque : En réalité, il existe deux bandes de valences dans la plupart des semi-conducteurs, qui coïncident en $k = 0$ (on dit alors qu'il y a dégénérescence). Par soucis de simplicité, nous n'en considérerons qu'une seule par la suite.

Evolution en fonction de la température

A $T = 0 K$, tous les électrons sont situés dans la bande de valence, qui est pleine. Aucun courant ne peut donc circuler.

Pour $T > 0 K$, des électrons, issus de la bande de valence, vont peupler la bande de conduction, et libérer des places dans cette bande de valence : ce défaut d'électrons est appelé **trou**. Plus la température est élevée et plus la quantité d'électrons dans la bande de conduction sera grande, ainsi que la quantité de trous dans la bande de valence. La figure 1.6 donne deux exemples symboliques de diagrammes de bandes (allures des bandes du Si et du GaAs), schémas sur lesquels on a figuré les deux bandes de valence.

Caractéristiques des bandes

L'essentiel des phénomènes électroniques (et optiques) concernent les électrons situés en bas de la bande de conduction et en haut de la bande de valence, c'est à dire aux zones caractérisées par le maximum de densité de porteurs ⁸.

Le diagramme des bandes permet de classer les semiconducteurs en deux catégories :

- les semiconducteurs à **gap direct** : le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont face à face (correspondent au même vecteur d'onde \vec{k}). C'est le cas du GaAs (figure 1.6(a)).
- les semiconducteurs à **gap indirect** : le maximum de la bande de valence n'est pas en face du minimum de la bande de conduction (ils correspondent à

⁸Il faut ici remarquer que l'essentiel des électrons de la bande de conduction se situe au minimum de la bande de conduction : afin d'évoluer vers un système stable, l'énergie des électrons doit être minimale. On fera ici le parallèle avec une goutte de champagne dans une flûte : la goutte a tendance à se déplacer vers le point le plus bas de la flûte (le verre se remplit bien au fond d'abord!). En revanche, l'essentiel des trous réside au maximum de la bande de valence. Afin d'évoluer vers un système stable, et en raison du caractère dual des trous vis à vis des électrons, l'énergie des trous a tendance à augmenter vers un maximum : les électrons de la bande de valence ont en effet tendance à descendre, libérant ainsi les trous vers le haut. Les bulles correspondent à un manque de gouttes (trous) et évoluent bien vers le point le plus haut de la flûte, puisque les gouttes.

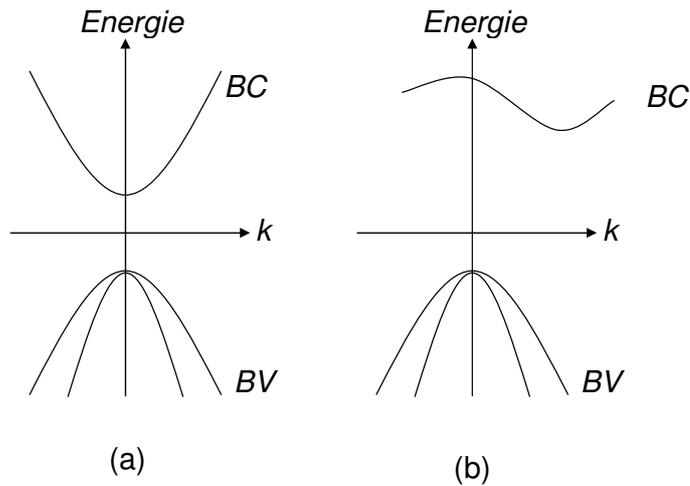


FIG. 1.6 – Allure du diagramme des bandes d'énergie : (a) GaAs; (b) Si

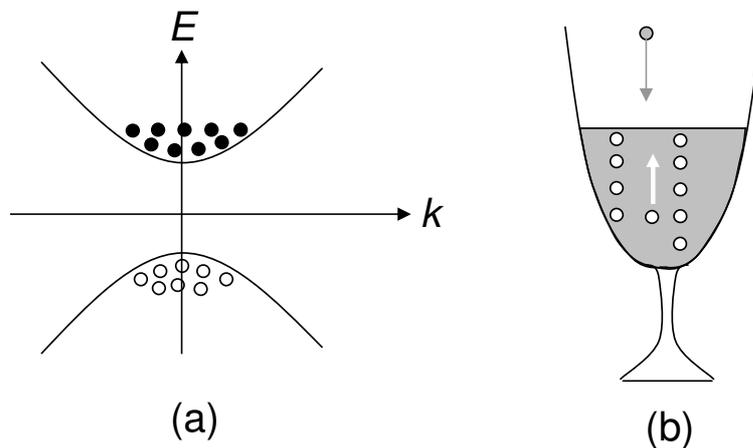


FIG. 1.7 – (a) : les électrons de la bande de conduction sont essentiellement localisés en bas de bande et les trous de la bande de valence en haut ; (b) analogie avec une flûte de champagne : les gouttes ont tendance à aller vers le point le plus bas tandis que les bulles (absences de gouttes) montent.

des vecteurs d'onde \vec{k} différents). C'est le cas du silicium (figure 1.6(b)) ou du Germanium.

Cette notion de gap direct ou indirect est importante pour les phénomènes optiques, comme nous le verrons dans le chapitre sur l'optoélectronique.

Lien avec le réseau direct

Lorsqu'on étudiera les semiconducteurs dans l'espace direct, afin de connaître l'évolution de l'énergie des électrons en fonction de la position dans le matériau (ce que l'on fera la plupart du temps) on représentera l'évolution du minimum de la

bande de conduction, noté E_c , et du maximum de la bande de valence, noté E_v , en fonction de l'abscisse dans le semiconducteur. L'énergie de gap E_g correspond à l'écart entre ces deux extrema. On a alors :

$$\boxed{E_g = E_c - E_v} \quad (1.5)$$

Mais une telle représentation ne permet pas de savoir si le matériau est à gap direct ou indirect.

Remarque : l'énergie de gap E_g est une constante du matériau, qui ne dépend que de la température et du matériau.

Ordres de grandeur :

A température ambiante ($T = 300 \text{ K}$), on a les gaps suivants :

$$E_g(\text{Si}) = 1.12 \text{ eV}$$

$$E_g(\text{GaAs}) = 1.42 \text{ eV}$$

$$E_g(\text{Ge}) = 0.66 \text{ eV}$$

1.1.5 Cas des isolants et des métaux

Les autres types de cristaux sont aussi caractérisés par un diagramme des bandes d'énergie. C'est essentiellement la valeur de l'énergie de gap E_g qui différencie les différentes propriétés des cristaux.

- Pour un semiconducteur, les gap sont de l'ordre de grandeur de 1 eV , comme le montrent les ordres de grandeurs précédents.
- Les isolants sont des matériaux caractérisés par des grands gap : typiquement $E_g > 3 \text{ eV}$. A température ambiante, l'énergie d'agitation thermique vaut $kT \approx 25 \text{ meV} \ll E_g$, ce qui signifie que très peu d'électrons passent de la bande de valence vers la bande de conduction, d'où la nature isolante de ces matériaux.
- Les métaux sont caractérisés essentiellement par un gap très faible. L'agitation thermique permet ainsi de peupler facilement la bande de conduction (en électrons). Ce sont donc de bons conducteurs.

On peut ici justifier qualitativement le nom de semiconducteur donné aux structures cristallines ayant un gap intermédiaire. Ils sont en effet caractérisés par une conduction plus ou moins importante, en fonction de leur nature (entre autre du gap), de la température, de la présence d'impuretés etc... Ce gap étant intermédiaire, on comprend que certains électrons peuvent atteindre la bande de conduction, justifiant l'appellation de "conducteur", mais en quantité beaucoup plus faible que dans le cas des métaux, justifiant ainsi l'appellation "semi".

1.1.6 Caractérisation des porteurs

Déplacement des trous

Lorsque la bande de valence est pleine (à 0 K par exemple), tous les électrons, au nombre de N (très élevé!), sont liés aux atomes. N'ayant pas d'électrons dans la bande de conduction et la bande de valence étant pleine, il n'y a donc pas de mouvement électronique possible et donc pas de courant.

Supposons que certains électrons (au nombre de $n_0 \ll N$), initialement situés dans la bande de valence (BV), passent dans la bande de conduction (par agitation thermique si $T > 0\text{ K}$, ou par éclaircissement). Ils libèrent donc des places inoccupées dans la bande de valence (les trous). On a donc n_0 trous dans la bande de valence.

Appliquons un champ \vec{E} à ce semiconducteur, orienté par exemple vers la gauche. Les électrons de la bande de conduction peuvent se mouvoir librement. Ils subissent une force $\vec{f}_e = -q\vec{E}$, qui a pour conséquence de les faire déplacer vers la droite, créant ainsi un courant d'électrons orienté vers la gauche.

Les électrons de la bande de valence vont également voir ce champ et se déplacer en

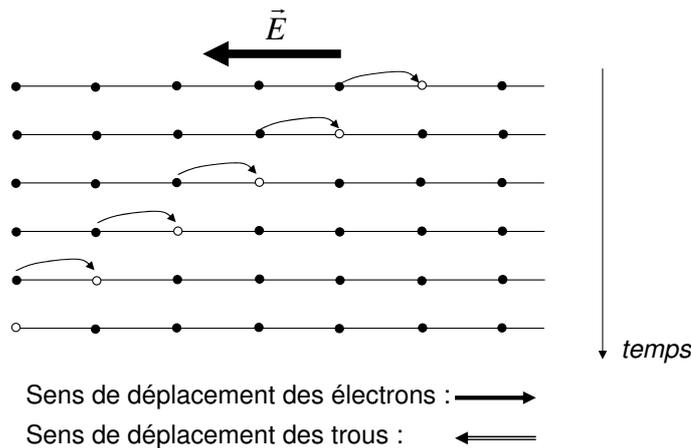


FIG. 1.8 – Déplacement d'un trou dans la bande de valence : dans ce modèle à une dimension, on a représenté l'évolution des électrons de la bande de valence et un unique trou en fonction du temps. Sous l'action d'un champ électrique orienté vers la gauche, l'électron (de la bande de valence) à gauche du trou va pouvoir combler ce trou, ce déplacement étant dû à la force subie par cet électron. De proche en proche, les électrons vont se déplacer vers la droite et le trou vers la gauche, ce dernier créant un courant orienté dans le sens de déplacement du trou c'est à dire vers la gauche, qui est aussi le sens du champ.

fonction des trous libres. La figure 1.8 illustre l'évolution temporelle de ce phénomène avec 1 électron dans la bande de conduction (non représenté sur la figure afin de la simplifier), 6 électrons dans la bande de valence et 1 trou (donc 7 électrons au total), et dans un modèle à 1 dimension. Contrairement aux électrons de la bande de conduction qui peuvent se déplacer librement, ces électrons de la bande de valence devront combler de proche en proche les trous pour pouvoir se déplacer. En fait, tout se passe comme si le trou se déplaçait vers la gauche. Plutôt que de décrire

ce mouvement des $N - n_0$ électrons dans la bande de valence, il est plus simple de considérer le déplacement des trous.

On considèrera alors par la suite un second type de porteur de charge : le trou. C'est une quasi-particule, de charge positive ($+q$), qui se déplace dans la bande de valence dans le sens opposé au sens de déplacement des électrons. **Il existe donc deux types de porteurs dans un semiconducteur : les électrons et les trous.** On supposera par la suite que les électrons se déplacent seulement dans la bande de conduction, tandis que les trous se déplacent seulement dans la bande de valence.

Notion de masse effective

Electron dans le vide On rappelle que la quantité de mouvement d'un électron (masse m_e) s'écrit, en mécanique quantique : $\vec{p} = \hbar\vec{k}$. L'énergie cinétique associée vaut $E_{cin} = \frac{p^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$. La variation de l'énergie cinétique d'un électron dans le vide est parabolique en fonction du vecteur d'onde (relation de dispersion de l'électron dans le vide).

Cas d'un électron dans la bande de conduction et d'un trou dans la bande de conduction Considérons maintenant un électron dans la bande de conduction d'un semiconducteur. Nous avons remarqué plus haut que l'essentiel des électrons - et des phénomènes électriques mis en jeu - se situait au minimum de la bande de conduction.

Considérons, pour simplifier l'étude, un semiconducteur à gap direct : ce minimum de la bande de conduction E_c se situe à $k = 0$. Effectuons un développement limité au second ordre de l'énergie valable au voisinage de ce minimum :

$$E(k) = E(k=0) + \underbrace{\frac{\partial E}{\partial k}(k=0)}_{=0} k + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2}(k=0) k^2 \quad (1.6)$$

$$= E_c + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2}(k=0) k^2 \quad (1.7)$$

En posant :

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}(k=0)} \quad (1.8)$$

ce développement limité se met sous la forme suivante :

$$E(k) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (1.9)$$

Cela revient à assimiler la variation de la bande de conduction localement (proche du minimum) à une parabole : c'est l'approximation parabolique des bandes d'énergie. L'équation 1.9 signifie qu'un électron de la bande de conduction se comporte comme un électron dans le vide (électron libre) à condition de remplacer sa masse m_e par une masse fictive m^* qui dépend du matériau, appelée **masse effective** de l'électron,

qui rend compte de l'inertie du mouvement de l'électron due au matériau.

Le cas d'un semiconducteur à gap indirect est plus complexe et fait intervenir deux masses effectives. Dans la suite de ce cours, on ne considèrera pour l'électron qu'une seule masse effective (afin de simplifier).

En ce qui concerne les trous, une démarche analogue peut être effectuée. La présence de deux bandes de valence permet de définir deux masses effectives. Par soucis de simplicité, nous ne considèrerons également qu'une seule masse effective pour les trous.

En général, on exprime la masse effective m^* d'un porteur en fonction de la masse m_e ($\approx 9.1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$) de l'électron.

Ordres de grandeur :

Pour le GaAs, la masse effective de l'électron vaut : $m^* = 0.067 m_e$.

Remarque : la masse effective des trous est plus élevée que la masse effective d'un électron (pour un même semiconducteur). Il est donc plus difficile pour un trou de se déplacer que pour un électron : l'inertie des trous est plus grande, ils sont donc moins mobiles ⁹.

Statistique de Fermi-Dirac

Les électrons sont des particules appelées fermions. La physique statistique nous apprend que les fermions obéissent à une règle de répartition en fonction de l'énergie et de la température : c'est la statistique de Fermi-Dirac. Ainsi, la probabilité d'avoir un électron à un niveau d'énergie E , et à la température T est donnée par la fonction de Fermi-Dirac :

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{(E-E_F)/k_B T}} \quad (1.10)$$

où k_B est la constante de Boltzmann, et E_F est l'énergie ou **niveau de Fermi** du matériau considéré. Cette énergie est un potentiel chimique qui quantifie le travail qu'il faut fournir au système pour apporter un électron supplémentaire (provenant de l'infini) au réseau. Ce niveau reflète alors la densité d'électrons dans le matériau. Plus cette énergie est élevée, et plus il y aura d'électrons aux hautes énergies.

La figure 1.9 représente l'évolution de la fonction de Fermi-Dirac pour 4 températures : 0 K, 250 K, 300 K et 400 K. A $T = 0 \text{ K}$, tous les électrons sont situés en dessous du niveau de Fermi :

$$\begin{cases} f(E) = 1 & \text{pour } E < E_F \\ f(E) = 0 & \text{pour } E > E_F \end{cases}$$

Pour $T > 0 \text{ K}$, les électrons se répartissent continûment en fonction de E . Plus la température est élevée, plus la fonction de Fermi-Dirac est étalée (autour de l'énergie de Fermi) : les électrons vont peupler les niveaux d'énergie plus élevés. Par ailleurs, cet étalement de la fonction de Fermi-Dirac (ie la plage d'énergie correspondant à une variation significative de cette fonction) vaut approximativement $4k_B T$ (autour de E_F).

⁹il ne faut pas oublier que le déplacement d'un trou correspond en réalité au déplacement d'un grand nombre d'électrons. Ce déplacement est en quelque sorte plus "difficile".

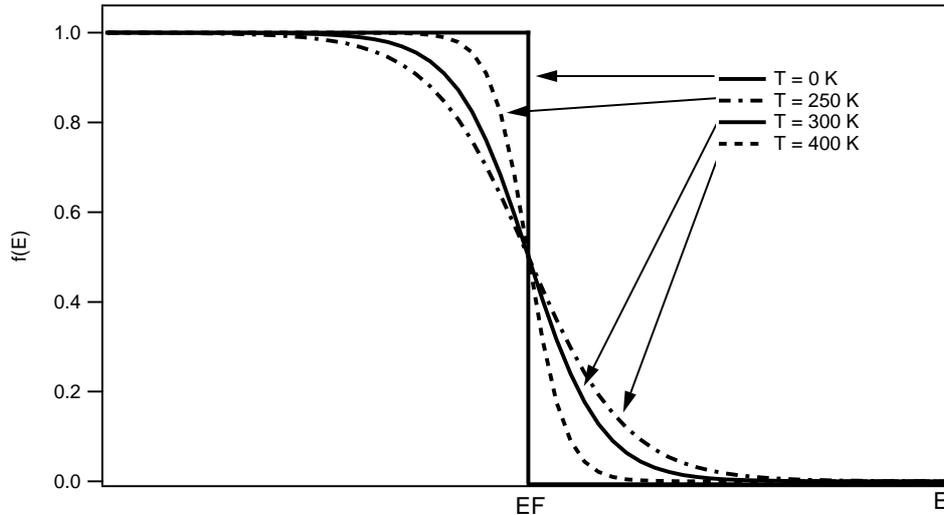


FIG. 1.9 – Fonction de Fermi-Dirac en fonction de l'énergie, pour 4 températures différentes.

Si $E - E_F \ll k_B T$: $f(E) \approx 1$

Si $E - E_F \gg k_B T$: $f(E) \approx e^{-(E-E_F)/k_B T}$: c'est l'approximation de Boltzmann ¹⁰.

En ce qui concerne les trous, la probabilité d'avoir un trou à l'énergie E vaut $1 - f(E)$. En effet, pour une énergie donnée E , on est sûr d'avoir un électron ou un trou. La probabilité d'avoir un électron (donnée par $f(E)$) ou un trou (donnée par $h(E)$) vaut donc 1 : $f(E) + h(E) = 1$. D'où $h(E) = 1 - f(E)$.

Position du niveau de Fermi Dans la plupart des semiconducteurs que nous étudierons cette année, **le niveau de Fermi se situera dans la bande interdite** : $E_v < E_F < E_c$. De tels semiconducteurs sont qualifiés de **non-dégénérés**. Les semiconducteurs pour lesquels le niveau de Fermi est dans une bande permise (valence ou conduction) sont appelés semiconducteurs dégénérés.

Densité d'état

La notion précédente de statistique de Fermi est une répartition imposée par la nature des électrons. Quel que soit le matériau considéré, la statistique de Fermi Dirac est la même. Entre une énergie E et $E + dE$, et pour un semiconducteur donné, un nombre maximal d'électrons peut exister. Cette limite fait intervenir une quantité d'énergie que l'on peut stocker par unité de volume : c'est la **densité d'états d'énergie**, exprimée en $cm^{-3}.J^{-1}$. Cette densité d'état d'énergie existe

¹⁰cette approximation est importante car nous verrons un peu plus loin que les électrons de la bande de conduction la vérifient dans la plupart des cas, simplifiant ainsi grandement les expressions.

pour les électrons (et est notée $n_c(E)$) et pour les trous (notée $n_v(E)$). Ces densités reflètent la densité maximale de porteurs que peut "stocker" un semiconducteur à une énergie E . Elles s'expriment, pour des semiconducteurs non-dégénérés selon les formules suivantes :

$$n_c(E) = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E - E_c} \quad (1.11)$$

$$n_v(E) = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E_v - E} \quad (1.12)$$

Répartition des porteurs dans un semiconducteur

La densité d'électrons $n(E)$ à une énergie E dans un semiconducteur est donc fonction de la densité d'état d'énergie du semiconducteur $N_c(E)$ et de la statistique de Fermi-Dirac $f(E)$: $n(E) = N_c(E)f(E)$. Pour déterminer la densité d'électrons n de la bande de conduction, il suffit de sommer sur toutes les énergies possibles de la bande de conduction :

$$n = \int_{BC} N_c(E)f(E)dE \quad (1.13)$$

De même, la densité de trous p dans la bande de valence s'écrit :

$$p = \int_{BV} N_v(E) (1 - f(E)) dE \quad (1.14)$$

Dans le cas de semiconducteurs non-dégénérés et compte-tenu de l'approximation de Boltzmann, ces équations se mettent sous la forme :

$$\boxed{\begin{aligned} n &= N_c e^{-\frac{E_c - E_F}{k_B T}} \\ p &= N_v e^{\frac{E_v - E_F}{k_B T}} \end{aligned}} \quad (1.15)$$

N_c et N_v sont les **densités équivalentes d'états**. Ces deux grandeurs dépendent du matériau et de la température.

Ces formules méritent quelques commentaires. Tout d'abord, la variation exponentielle vient directement de l'approximation de Boltzmann. Cette exponentielle est fonction de l'écart entre les bande d'énergie et le niveau de Fermi (puisqu'il repère la densité d'électrons) et de l'énergie thermique (nous avons vu que la température influençait fortement la présence d'électrons dans la bande de conduction). Nous verrons un peu plus tard que plus le niveau de Fermi est élevé (resp. plus il est faible) et plus la densité d'électrons (resp. de trous) dans la bande de conduction (resp. de valence) est grande. Pour ne pas se tromper sur le signe de ces équations, il faut donc que n soit une fonction croissante de E_F et que p soit décroissante.

Remarque : ces deux expressions permettent d'exprimer le produit $p \times n$ en fonction du gap :

$$n \times p = N_c N_v e^{(E_v - E_c)/k_B T} = N_c N_v e^{-E_g/k_B T} \quad (1.16)$$

Ordres de grandeur :

N_c et N_v varient typiquement de 10^{17} cm^{-3} à 10^{19} cm^{-3} . Ainsi, à température ambiante, dans le Silicium, on a : $N_c = 2.7 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ et $N_v = 1.1 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$.

1.1.7 Matériaux les plus fréquents dans les composants

Le semiconducteur le plus utilisé dans l'électronique est le Silicium. C'est un élément très abondant sur Terre (le second dans la croûte terrestre). Il est utilisé dans la plupart des circuits électroniques (excepté en haute fréquence) et opto-électroniques au niveau de certains photodétecteurs. L'industrie des semiconducteurs repose majoritairement sur le Silicium. L'abondance du matériau et l'importance de cette filière permettent d'avoir des coûts de production des circuits électroniques les plus compétitifs. C'est le donc le matériau à choisir s'il permet de satisfaire le besoin exprimé.

Le GaAs est un autre composé largement utilisé en optoélectronique (en raison de son gap direct) et en électronique haute fréquence (en raison de la forte mobilité des porteurs, comme nous le détaillerons plus loin).

Enfin, citons aussi le Ge qui est assez présent dans l'industrie des semiconducteurs, par exemple dans l'électronique rapide.

1.2 Propriétés des semiconducteurs

1.2.1 Notion d'équilibre thermodynamique

Un semiconducteur (et plus généralement un matériau) est à l'équilibre thermodynamique s'il n'est soumis à aucune perturbation externe (pas d'éclairage, pas de rayonnement, pas de tension appliquée) et s'il est en équilibre thermique (on attend suffisamment longtemps pour le régime permanent soit établi).

Un semiconducteur en équilibre thermodynamique est caractérisé par un niveau de Fermi constant.

On peut montrer par ailleurs que le produit $p \times n$ est constant à l'équilibre et vaut :

$$\boxed{p \times n = n_i^2} \quad (1.17)$$

où n_i est la **densité (de porteurs) intrinsèque**, paramètre caractéristique d'un semiconducteur. D'après l'équation 1.16, on peut relier cette densité de porteurs avec le gap :

$$n_i = \sqrt{N_c N_v} e^{-E_g/2k_B T} \quad (1.18)$$

Cette densité intrinsèque est importante car elle caractérise la densité des porteurs d'un semiconducteur pur (dit intrinsèque) à l'équilibre (thermodynamique).

Ordres de grandeur :

Ce paramètre est très variable d'un semiconducteur à l'autre : il s'étend typiquement de 10^6 cm^{-3} à 10^{13} cm^{-3} . Voici quelques valeurs à température ambiante :

$$n_i(\text{GaAs}) \approx 10^6 \text{ cm}^{-3}$$

$$n_i(\text{Si}) \approx 10^{10} \text{ cm}^{-3}$$

$$n_i(\text{Ge}) \approx 10^{13} \text{ cm}^{-3}$$

Cette densité est de plusieurs ordres de grandeurs inférieure à la densité d'atomes dans le réseau (12 ordres de grandeurs dans le cas du silicium).

1.2.2 Caractérisation d'un semiconducteur

On caractérisera un semiconducteur par les grandeurs suivantes :

E_c, E_v	: minimum de la bande de conduction et maximum de la bande de valence
E_g	: énergie de gap
E_F	: la position du niveau de Fermi
n_i	: la densité intrinsèque
n	: la densité d'électrons dans la bande de conduction
p	: la densité de trous dans la bande de valence
$\sigma_n, \sigma_p, \sigma$: la conductivité des électrons, des trous, totale
ρ	: la résistivité ($= 1/\sigma$)
N_c, N_v	: densités équivalentes d'états

On peut montrer que la bande de conduction E_c , la bande de valence E_v et le niveau de Fermi intrinsèque E_i sont relié au potentiel V existant dans la structure par la relation :

$$\boxed{E_{c,v \text{ ou } i} = -q V + \text{constante}} \quad (1.19)$$

Dans la plupart des dispositifs à semiconducteurs, l'un des deux types de porteurs a une densité plus importante (de plusieurs ordres de grandeurs) par rapport à l'autre. On qualifie de **porteurs majoritaires** les porteurs dont la densité est la plus grande, et les autres de **porteurs minoritaires**.

A un porteur minoritaire, on associe un temps caractéristique appelé **durée de vie du porteur minoritaire**, qui est lié au matériau et à la nature du porteur (électron ou trou). Nous verrons plus loin que les porteurs minoritaires peuvent disparaître par processus de recombinaison. Les porteurs majoritaires disparaissent aussi par le même processus, mais en raison de leur caractère majoritaire, cette disparition n'est pas significative. La durée de vie d'un minoritaire correspond au temps moyen pendant lequel le porteur reste minoritaire avant de disparaître par recombinaison. L'inverse de ce temps est proportionnel à la probabilité de disparition d'un minoritaire, c'est à dire à la probabilité d'avoir une recombinaison.

Ordres de grandeur :

L'ordre de grandeur de la durée de vie d'un porteur minoritaire dans les dispositifs à semiconducteurs classiques est 1 à 10 μs .

A chaque type de porteur (électron ou trou) on associe une conductivité qui permet de calculer la conductivité totale du matériau (l'inverse de la résistivité) :

$$\sigma = \frac{1}{\rho} = \sigma_n + \sigma_p \quad (1.20)$$

Il faut également mentionner que les semiconducteurs restent électriquement neutres en régime stationnaire (permanent). Ainsi, on dispose d'une équation supplémentaire la conservation de l'électroneutralité.

$$\sum \text{charges} > 0 = \sum \text{charges} < 0 \quad (1.21)$$

Nous verrons un peu plus loin que d'autres paramètres permettront de caractériser les semiconducteurs, comme par exemple la mobilité des porteurs, le coefficient de diffusion des porteurs minoritaires ...

1.2.3 Semiconducteur intrinsèque

Il s'agit d'un semiconducteur "pur". On a autant d'électrons dans la bande de conduction que de trous dans la bande de valence (chaque électron de la bande de conduction est issu de la bande de valence où il a libéré un trou) :

$$\begin{cases} n = n_i \\ p = n_i \end{cases}$$

où n_i est la densité intrinsèque que nous avons déjà rencontrée. Ainsi, la densité de porteurs (électron, trou) d'un semiconducteur intrinsèque est bien plus faible que la densité d'atomes de ce semiconducteur.

Remarquons également que plus n_i est élevé, plus le matériau intrinsèque sera conducteur. L'équation 1.18 nous montre que plus le gap du matériau est élevé, moins la densité d'électrons est grande (dans la bande de conduction), et donc moins le matériau est conducteur. On retrouve ici par cette équation le raisonnement qualitatif fait au paragraphe 1.1.5 concernant les isolants et les métaux.

La position du niveau de Fermi d'un semiconducteur intrinsèque, se détermine en écrivant l'égalité de la densité des deux types de porteurs et en utilisant les relations 1.15 :

$$n = p \quad (1.22)$$

$$N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_B T}\right) = N_v \exp\left(\frac{E_v - E_F}{k_B T}\right) \quad (1.23)$$

$$E_F = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{k_B T}{2} \ln \frac{N_v}{N_c} \quad (1.24)$$

Compte-tenu du fait que, d'une part N_c et N_v sont du même ordre de grandeur et d'autre part que $k_B T$ est petit devant les énergies des bandes, on peut simplifier cette dernière équation et considérer que :

$$E_F \approx \frac{E_c + E_v}{2} \quad (1.25)$$

Ainsi : **le niveau de Fermi d'un semiconducteur intrinsèque est à peu près situé au milieu de la bande interdite.** Cette propriété nous encourage à définir un nouveau niveau d'énergie de référence (fixe) : le **niveau de Fermi intrinsèque**, noté E_i , qui correspond au milieu de la bande interdite. Ainsi, pour un semiconducteur intrinsèque : $E_F \approx E_i$.

Les équations 1.15 peuvent aussi s'exprimer en fonction de E_i :

$$n = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_B T}\right) \quad (1.26)$$

$$= \underbrace{N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_i}{k_B T}\right)}_{n'} \exp\left(-\frac{E_i - E_F}{k_B T}\right) \quad (1.27)$$

Pour un semiconducteur intrinsèque, cette dernière expression s'écrit, puisque $E_i = E_F$: $n = n'$. Le terme n' correspond donc à la densité de porteur intrinsèque n_i . Une démarche analogue peut être effectuée pour la densité de trous. Ainsi, la densité d'électrons et de trous peut s'exprimer selon les expressions suivantes (valables quel que soit le type de semiconducteur pourvu qu'il ne soit pas dégénéré) :

$$\boxed{\begin{aligned} n &= n_i \exp\left(-\frac{E_i - E_F}{k_B T}\right) \\ p &= n_i \exp\left(\frac{E_i - E_F}{k_B T}\right) \end{aligned}} \quad (1.28)$$

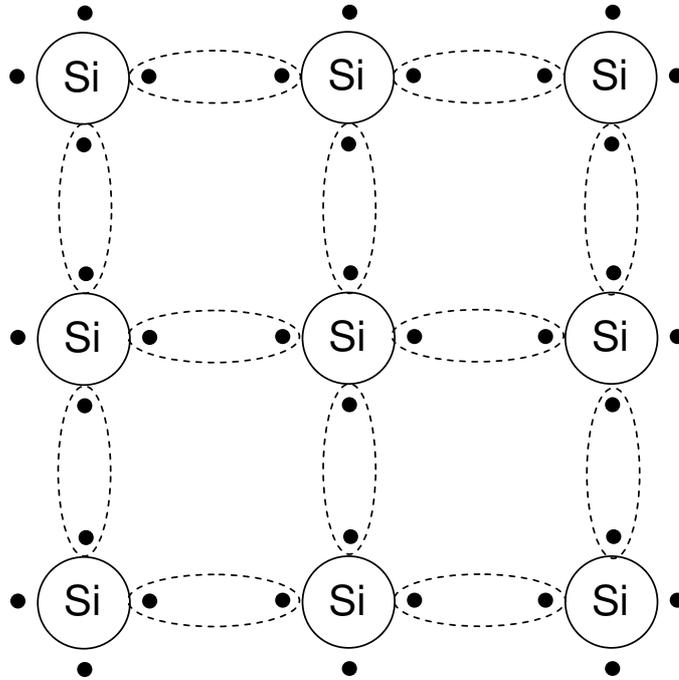


FIG. 1.10 – Cas du Silicium intrinsèque

1.2.4 Dopage d'un semiconducteur

Afin d'augmenter la densité d'électrons ou de trous, on peut remplacer quelques atomes du matériau intrinsèque par des atomes, appelés **impuretés**, ayant un électron supplémentaire ou en défaut par rapport aux atomes du réseau cristallin. On dit que l'on a dopé le semiconducteur.

- Si on dope par des impuretés ayant un électron de plus que les atomes du semiconducteur intrinsèque, on augmente la densité d'électrons : on dit de le matériau est de **type N** (dopage de type N)

- Si on dope par des impuretés ayant un électron de moins que les atomes du semiconducteur intrinsèque, on augmente la densité de trous : on dit de le matériau est de **type P** (dopage de type P)

Nous allons étudier qualitativement les deux types de dopage sur un exemple simplifié : le silicium (en deux dimensions).

Cas du silicium intrinsèque

L'atome de Silicium possède 4 électrons sur sa couche de valence. Il sera donc entouré de 4 autres atomes de silicium : il y aura 4 doublets électroniques réalisant les liaisons covalentes, comme c'est illustré sur la figure 1.10 (très simplifiée). On rappelle par ailleurs que le niveau de Fermi est alors situé au milieu de la bande interdite et que $E_F = E_i$ (cf figure 1.13(b)).

Dopage de type N

Il s'agit de remplacer quelques atomes de silicium par des atomes ayant un électron de plus sur la couche de valence. De tels atomes sont appelés **atomes donneurs**, car ils donnent un électron supplémentaire. Par exemple, dans le cas du Silicium, on remplace certains atomes de Si par des atomes de Phosphore (P), élément situé dans la V^{ème} colonne ¹¹. Cet électron supplémentaire ne participe pas aux liaisons covalentes qui sont saturées, mais est situé dans la bande de conduction : la densité d'électrons augmente. La figure 1.11 illustre ce type de dopage.

Remarque : la structure reste électriquement neutre. Si on note N_d la densité

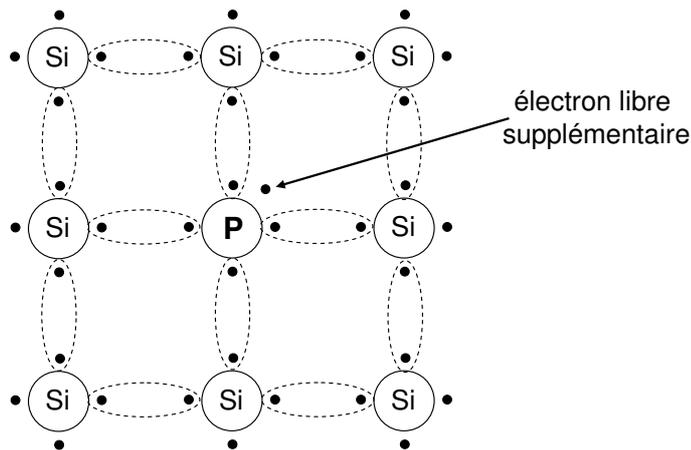


FIG. 1.11 – Cas du Silicium dopé N

d'atomes donneurs, l'équation d'électro-neutralité s'écrit :

$$n = p + N_d \quad (1.29)$$

¹¹il a donc 5 électrons sur sa couche de valence.

Tenant compte, à l'équilibre, de l'équation $p \times n = n_i^2$, on montrera en TD que l'on peut considérer les approximations suivantes :

$$n \approx N_d \quad (1.30)$$

$$p \approx \frac{n_i^2}{N_d} \ll N_d \quad (1.31)$$

La densité d'électrons augmentant par rapport au semiconducteur intrinsèque, on a : $n > n_i$ et $p < n_i$. Les équations 1.28 nous montrent alors que le niveau de Fermi est au dessus du niveau de Fermi intrinsèque : $E_F > E_i$.

Ainsi, **dans un semiconducteur de type N, le niveau de Fermi est plus proche de la bande de conduction que de la bande de valence**, comme l'illustre la figure 1.13(a).

Les équations 1.15 (ou 1.28) permettent de calculer la position exacte du niveau de Fermi par rapport à la bande de conduction et de valence (ou par rapport au niveau de Fermi intrinsèque) connaissant le dopage :

$$E_F = E_c + k_B T \ln(N_d/N_c) \quad (1.32)$$

$$= E_i + k_B T \ln(N_d/n_i) \quad (1.33)$$

$$> E_i$$

$$E_F = E_v + k_B T \ln(N_v N_d)/n_i^2 \quad (1.34)$$

Ordres de grandeur :

Les dopages conduisant à des semiconducteurs non dégénérés correspondent à des densités d'atomes donneurs typiquement comprises entre 10^{15} cm^{-3} et 10^{18} cm^{-3} . Ces densités sont donc de 4 à 8 ordres de grandeurs plus faibles que les densités d'atomes du réseau intrinsèque, mais plus élevées que la densité intrinsèque. On ne remplace donc que très peu d'atomes, mais ce qui est suffisant pour augmenter de manière significative la densité d'électrons. Par ailleurs, ce dopage ne modifie pas le gap.

On a donc, à l'équilibre : $N_{Si} \gg n = N_d \gg n_i \gg p$. On augmente ainsi de plusieurs ordres de grandeurs la densité d'électrons (qui deviennent les porteurs majoritaires) et on diminue de plusieurs ordres de grandeurs la densité de trous (qui deviennent les porteurs minoritaires) par rapport à la situation intrinsèque.

Dopage de type P

Il s'agit de remplacer quelques atomes du réseau cristallin par des atomes ayant un électron de moins sur la couche de valence. De tels atomes sont appelés **atomes accepteurs**, car ils peuvent accepter un électron supplémentaire et donc mettent donc en jeu un trou (puisque'il y a un manque d'électron au niveau des liaisons covalentes). Par exemple, dans le cas du Silicium, on remplace certains atomes de Si

par des atomes de Bore (B), élément situé dans la III^{ème} colonne ¹². Cette absence d'électron (le trou) est un défaut de la bande de valence : la densité de trous augmente. La figure 1.12 illustre ce type de dopage.

Remarque : la structure reste également électriquement neutre. Si on note N_a la

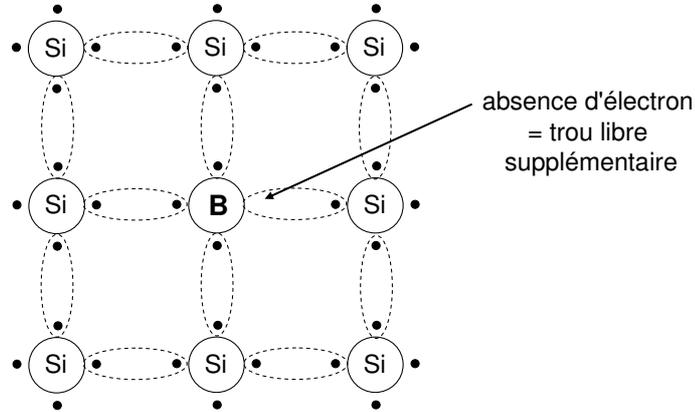


FIG. 1.12 – Cas du Silicium dopé P

densité d'atomes accepteurs, l'équation d'électro-neutralité s'écrit :

$$n + N_a = p \quad (1.35)$$

Tenant compte, à l'équilibre, de l'équation $pn = n_i^2$, on montrera en TD que l'on peut considérer les approximations suivantes :

$$p \approx N_a \quad (1.36)$$

$$n \approx \frac{n_i^2}{N_a} \ll N_a \quad (1.37)$$

De manière symétrique par rapport au type N, la densité de trous augmente (par rapport au semiconducteur intrinsèque), et on a alors : $n < n_i$ et $p > n_i$. Les équations 1.28 nous montrent que le niveau de Fermi est au dessous du niveau de Fermi intrinsèque : $E_F < E_i$.

Ainsi : **dans un semiconducteur de type P, le niveau de Fermi est plus proche de la bande de valence que de la bande de conduction**, comme l'illustre la figure 1.13(c).

Les équations 1.15 (ou 1.28) permettent de calculer la position exacte du niveau de Fermi par rapport à la bande de conduction et de valence (ou par rapport au niveau de Fermi intrinsèque) connaissant le dopage :

$$E_F = E_c - k_B T \ln(N_c N_a / n_i^2) \quad (1.38)$$

$$= E_i + k_B T \ln(n_i / N_a) \quad (1.39)$$

¹²il possède donc 3 électrons sur sa couche de valence.

$$< E_i$$

$$E_F = E_v + k_B T \ln(N_v/N_a) \quad (1.40)$$

Ordres de grandeur :

Comme dans le cas d'un dopage de type N, les dopages conduisant à des semiconducteurs non dégénérés de type P correspondent également à des densités d'atomes accepteurs typiquement comprises entre 10^{15} cm^{-3} et 10^{18} cm^{-3} . Ces densités sont donc de 4 à 8 ordres de grandeurs plus faibles que les densités d'atomes du réseau intrinsèque : on ne remplace donc que très peu d'atomes.

On a donc à l'équilibre : $N_{Si} \gg p = N_a \gg n_i \gg n$. On augmente ainsi de plusieurs ordres de grandeurs la densité de trous (qui deviennent les porteurs majoritaires) et on diminue de plusieurs ordres de grandeurs la densité d'électrons (qui deviennent les porteurs minoritaires) par rapport à la situation intrinsèque.

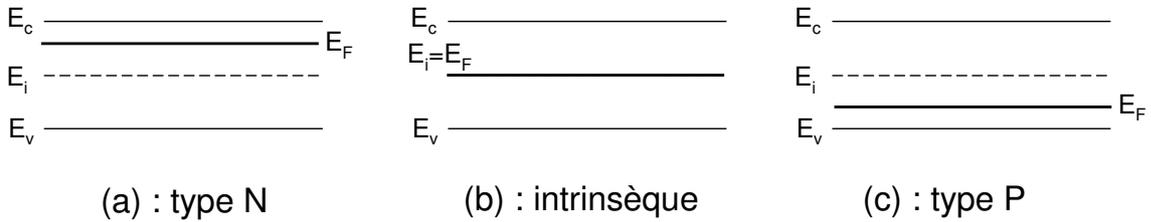


FIG. 1.13 – Position du niveau de Fermi, à l'équilibre et dans l'espace direct : (a) dans un SC de type N ; (b) dans un SC intrinsèque ; (c) dans un SC de type P.

Faible injection

Lors de l'étude des structures semiconductrices, nous prendrons une hypothèse supplémentaire, appelée **hypothèse de faible injection**, qui consiste à supposer que la variation des porteurs (majoritaires et minoritaires) reste faible devant la densité de porteurs majoritaires :

Dans un type N : $\Delta p, \Delta n \ll n_0 \approx N_d$

Dans un type P : $\Delta p, \Delta n \ll p_0 \approx N_a$

1.2.5 Génération de porteurs

Les porteurs peuvent être générés dans un semiconducteur essentiellement par deux phénomènes physiques :

- l'**agitation thermique**. L'énergie thermique peut exciter certains électrons de la bande de valence vers la bande de conduction. Un trou est alors créé dans la bande de valence. Il s'agit d'une création d'une paire électron/trou. Ce processus est responsable de la répartition des porteurs à l'équilibre, mais reste peu efficace.
- présence d'un **rayonnement électromagnétique**. Si on soumet un semiconducteur à un flux de photons, dont l'énergie du photon $h\nu$ est plus grande que l'énergie de gap du semiconducteur, l'absorption de photons peut générer des

paires électrons/trous : un électron passe de la bande de valence à la bande de conduction libérant un trou dans la bande de valence. C'est un processus très utilisé pour la génération de porteurs. Il est en outre exploité dans la conversion photons/électrons pour les photodétecteurs.

Quel que soit le processus, la génération de porteurs est caractérisée par un taux de génération g exprimé en $m^{-3}.s^{-1}$. Sous l'hypothèse de faible injection, ce taux de génération concerne essentiellement les porteurs minoritaires (la variation des porteurs majoritaires reste négligeable : $g \rightarrow 0$).

On peut montrer qu'il est égal au rapport de l'excès de porteurs créée (minoritaire ou majoritaire) par la durée de vie des porteurs minoritaires :

$$g_n = \frac{\Delta n}{\tau_n} \text{ ou } g_p = \frac{\Delta p}{\tau_p} \quad (1.41)$$

A titre d'exemple, considérons un semiconducteur de type N, initialement à l'équilibre : $n = n_0 = N_d$ et $p = p_0 = n_i^2/N_d$.

Sous éclairage, la densité des porteurs devient : $n = n_0 + \Delta n \approx N_d$ (en raison de l'hypothèse de faible injection) et $p = p_0 + \Delta p \approx \Delta p$ si le flux de photons est suffisamment élevé.

On a en outre la relation : $g = \frac{\Delta p}{\tau_p}$ et $p_0 \ll \Delta n = \Delta p = g\tau_p \ll N_d$ (création d'une paire électron-trou et hypothèse de faible injection).

1.2.6 Recombinaison des porteurs

C'est le phénomène inverse. Un électron de la bande de conduction retourne dans la bande de valence, cédant de l'énergie ¹³, et comble ainsi un trou. Ce phénomène est aussi caractérisé par un taux de recombinaison :

$$r_n = \frac{\Delta n}{\tau_n} \text{ ou } r_p = \frac{\Delta p}{\tau_p} \quad (1.42)$$

Ce processus de recombinaison concerne les porteurs minoritaires (dans le cas des porteurs majoritaires, la recombinaison n'est pas significative et donc très peu probable).

On retiendra essentiellement que : $r \rightarrow 0$ pour les porteurs majoritaires et $r \neq 0$ pour les porteurs minoritaires.

Remarques :

1. ce taux de recombinaison est proportionnel à l'excès de porteurs (minoritaires).
En effet, plus il y aura de porteurs minoritaires dans le dispositif, et plus la probabilité d'avoir une recombinaison sera élevée : ce taux doit donc être une fonction croissante de l'excès de porteurs minoritaires.

¹³deux types de recombinaisons peuvent avoir lieu : une recombinaison radiative, accompagnée alors de l'émission d'un photon, ou une recombinaison non radiative, l'énergie cédée permettant soit d'exciter des électrons de la bande de conduction vers de plus hautes énergies (recombinaison Auger) soit de faire vibrer (mécaniquement) le réseau cristallin (vibrations associées à une quasi-particule appelée phonon, par analogie au photon)

2. ce taux est inversement proportionnel à la durée de vie des porteurs minoritaires. Supposons cette durée de vie infinie. Cela signifie qu'un porteur minoritaire restera indéfiniment dans son état minoritaire : il ne se recombinera donc jamais. Le taux de recombinaison tend bien vers 0. Supposons maintenant cette durée de vie très courte (ou nulle). Cela signifie alors que les porteurs minoritaires vont très vite (instantanément dans le cas d'une durée de vie nulle) se recombiner. Ce taux doit donc être très grand, voire infini. Ainsi, cette dépendance du taux vis à vis de la durée de vie est cohérente avec l'approche intuitive que nous avons.

1.2.7 Transport électronique

Dans les semiconducteurs de "grandes dimensions" (dont les dimensions caractéristiques sont de l'ordre de grandeur du micromètre), deux phénomènes physiques essentiels sont responsables du courant : la conduction et la diffusion.

Phénomène de conduction

Sous l'action d'un champ électrique \vec{E} , les porteurs de charges sont mis en mouvement : c'est le phénomène de conduction, qui est régi par la loi d'ohm locale reliant la densité de courant $\vec{j}_n \text{ cond}$ (pour les électrons) au champ électrique appliqué via la conductivité σ_n :

$$\vec{j}_n \text{ cond} = \sigma_n \vec{E} \quad (1.43)$$

Si \vec{v}_n désigne la vitesse moyenne des électrons, cette expression peut également s'écrire :

$$\vec{j}_n \text{ cond} = \underbrace{-qn}_{\text{densité de charges}} \vec{v}_n \quad (1.44)$$

Or, dans un semiconducteur sous faible champ, la vitesse des porteurs (ici les électrons) est proportionnelle au champ électrique¹⁴, via le coefficient de mobilité μ_n :

$$\vec{v}_n = -\mu_n \vec{E} \quad (1.45)$$

On en déduit l'expression de la conductivité des électrons :

$$\boxed{\sigma_n = qn\mu_n} \quad (1.46)$$

De même pour les trous :

$$\vec{j}_p \text{ cond} = qp\vec{v}_p = \sigma_p \vec{E} \quad (1.47)$$

avec :

$$\boxed{\sigma_p = qp\mu_p} \quad (1.48)$$

¹⁴lorsque la valeur du champ augmente, la vitesse des porteurs sature. Le raisonnement qui suit ne sera donc valable que pour de faibles champs.

La densité de courant de conduction s'écrit donc :

$$\boxed{\begin{aligned}\vec{j}_n \text{ cond} &= qn\mu_n\vec{E} \\ \vec{j}_p \text{ cond} &= qp\mu_p\vec{E} \\ \vec{j}_{\text{cond}} &= \sigma\vec{E} \\ &= (qn\mu_n + qp\mu_p)\vec{E}\end{aligned}} \quad (1.49)$$

Remarques :

1. La mobilité μ d'un porteur (exprimée généralement en $cm^2.V^{-1}.s^{-1}$) quantifie l'inertie de ce porteur sous l'action d'un champ. Plus la mobilité est élevée, plus ce porteur sera mis en mouvement facilement, et plus le matériau sera conducteur (et aura une conductivité élevée).

Ce paramètre de mobilité est directement responsable de la réponse en fréquence des systèmes. Plus sa valeur sera élevée, plus le dispositif fonctionnera à haute fréquence. On peut montrer que cette mobilité se met sous la forme :

$$\mu = \frac{q\tau}{m^*} \quad (1.50)$$

où τ est le temps de relaxation ¹⁵ (temps moyen entre deux collisions) et m^* est la masse effective.

Cette expression permet de conclure, en tenant compte de la remarque effectuée sur les masses effectives des électrons et des trous, que la mobilité des électrons est plus élevée que la mobilité des trous : $\mu_n > \mu_p$. Ainsi, afin d'avoir des composants rapides, il faudra privilégier des semiconducteurs ayant des mobilités des porteurs élevées (d'où l'intérêt du GaAs) et si possible privilégier les électrons.

2. On peut donner les expressions de la conductivité pour les 3 types de semiconducteurs :

- pour un semiconducteur intrinsèque : $\sigma = qn_i(\mu_n + \mu_p)$.
- pour un semiconducteur de type N : $\sigma = qN_d\mu_n + qp\mu_p \approx qN_d\mu_n$
- pour un semiconducteur de type P : $\sigma = qn\mu_n + qN_a\mu_p \approx qN_a\mu_p$

Remarque : compte-tenu de l'équation 1.18, la conductivité σ et la résistivité ρ d'un semiconducteur intrinsèque peuvent s'exprimer en fonction du gap du matériau :

$$\sigma = q(\mu_n + \mu_p)\sqrt{N_c N_v} e^{-E_g/k_B T} \quad (1.51)$$

$$\rho = \frac{e^{E_g/k_B T}}{q(\mu_n + \mu_p)\sqrt{N_c N_v}} \quad (1.52)$$

On retrouve le fait que les matériaux de grands gap sont moins conducteurs : si E_g est élevée, la conductivité est faible et la résistivité importante.

Ordres de grandeur :

La mobilité est un paramètre qui varie de deux ou trois ordres de grandeurs selon

¹⁵ce n'est pas la durée de vie des porteurs.

le type de porteur et le type de matériaux, allant de $100 \text{ cm}^2.V^{-1}s^{-1}$ à environ $10000 \text{ cm}^2.V^{-1}s^{-1}$. Par exemple :

$$\begin{aligned} \text{Pour le Si} & : \mu_n = 1450 \text{ cm}^2.V^{-1}s^{-1} \\ & \mu_p = 370 \text{ cm}^2.V^{-1}s^{-1} \\ \text{Pour le GaAs} & : \mu_n = 8000 \text{ cm}^2.V^{-1}s^{-1} \\ & \mu_p = 400 \text{ cm}^2.V^{-1}s^{-1} \end{aligned}$$

On voit donc sur ces valeurs l'intérêt de l'utilisation du GaAs en haute fréquence : les électrons ont une plus grande mobilité dans le GaAs que dans le Silicium par exemple.

Phénomène de diffusion

Une inhomogénéité des porteurs (donc l'existence d'un gradient de porteurs) va se traduire par la mise en mouvement de ces porteurs afin de rendre homogène leur répartition : c'est le phénomène de **diffusion des porteurs**.

Ce phénomène est analogue à la diffusion de la chaleur ¹⁶, et obéit à la loi de diffusion de Fick. Si $\vec{j}_n \text{ diff}$ (resp. $\vec{j}_p \text{ diff}$) désigne le vecteur densité de courant de diffusion des électrons (resp. des trous), ce vecteur obéit à la loi de diffusion :

$$\vec{j}_n \text{ diff} = qD_n \overrightarrow{\text{Grad}} n \quad (1.53)$$

$$\vec{j}_p \text{ diff} = -qD_p \overrightarrow{\text{Grad}} p \quad (1.54)$$

Cette densité de courant est proportionnelle au gradient (c'est l'origine physique de ce courant) et à la charge (puisque c'est un courant électrique). La constante de proportionnalité D_n ou D_p est appelée **coefficient de diffusion**. Son unité est $\text{m}^2.s^{-1}$.

Attention au signe "−" concernant les trous.

A une dimension, ces équations s'écrivent :

$$\boxed{\begin{aligned} \vec{j}_n \text{ diff} &= qD_n \frac{dn}{dx} \vec{u}_x \\ \vec{j}_p \text{ diff} &= -qD_p \frac{dp}{dx} \vec{u}_x \end{aligned}} \quad (1.55)$$

La densité de courant de diffusion totale est la somme des courants de diffusion des électrons et des trous.

Courant total

Ainsi, le courant total circulant dans un semiconducteur se met sous la forme suivante :

$$\boxed{\vec{j} = q(n\mu_n + p\mu_p)\vec{E} + qD_n \overrightarrow{\text{Grad}} n - qD_p \overrightarrow{\text{Grad}} p} \quad (1.56)$$

¹⁶si on chauffe un barreau métallique sur un côté, la chaleur va se propager du point le plus chaud vers le point le plus froid afin d'homogénéiser la température : c'est la diffusion de la chaleur.

Relation d'Einstein

Il existe un lien entre la conduction et la diffusion : c'est la relation d'Einstein, relative à chaque type de porteurs :

$$\boxed{\begin{aligned} D_n &= \mu_n \frac{k_B T}{q} \\ D_p &= \mu_p \frac{k_B T}{q} \end{aligned}} \quad (1.57)$$

Equation de continuité

En effectuant un bilan local (dans un espace élémentaire de volume, pendant un instant élémentaire) concernant les mouvements des porteurs, leur génération ou leur disparition, on peut montrer que les densités de porteurs satisfont une équation appelée **équation de continuité** (ou encore équation d'évolution) ¹⁷ :

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} &= \frac{1}{q} \operatorname{div} \vec{j}_n + g_n - r_n \\ \frac{\partial p}{\partial t} &= -\frac{1}{q} \operatorname{div} \vec{j}_p + g_p - r_p \end{aligned}} \quad (1.58)$$

En régime stationnaire (indépendant du temps), et à une dimension, ces équations s'écrivent :

$$0 = \frac{1}{q} \frac{dj_n}{dx} \vec{u}_x + g_n - r_n \quad (1.59)$$

$$0 = -\frac{1}{q} \frac{dj_p}{dx} \vec{u}_x + g_p - r_p \quad (1.60)$$

1.2.8 Quasi-niveaux de Fermi

Position du problème

Considérons un semiconducteur de type N. A l'équilibre, il est caractérisé par :

- une densité $n = n_0 = N_d$ d'électrons (les porteurs majoritaires)
- une densité $p = p_0 = n_i^2/N_d \ll N_d$ de trous (les porteurs minoritaires)
- un niveau de Fermi E_F constant et plus proche de la bande de conduction que de la bande de valence, niveau qui sera noté E_{F0} à l'équilibre.

Les équations 1.28, page 22, permettent de définir la position du niveau de Fermi à l'équilibre par rapport au niveau de Fermi intrinsèque :

$$\begin{aligned} E_{F0} &= E_i + k_B T \ln \left(\frac{n}{n_i} \right) \\ &= E_i + k_B T \ln \left(\frac{n_0}{n_i} \right) \\ E_{F0} &= E_i + k_B T \ln \left(\frac{n_i}{p} \right) \end{aligned} \quad (1.61)$$

¹⁷cette équation est toujours vraie, aussi bien à l'équilibre que hors équilibre.

$$= E_i + k_B T \ln \left(\frac{n_i}{p_0} \right) \quad (1.62)$$

En égalisant ces deux équations, on retrouve la condition d'équilibre : $p \times n = n_i^2$. Supposons maintenant que l'on crée des paires électrons trous (par éclairage par exemple), tout en respectant l'hypothèse de faible injection. On est alors dans une situation hors équilibre, et les densités de porteurs deviennent :

$n = n_0 + \Delta n$, pour les électrons
 $p = p_0 + \Delta p$, pour les trous avec $p_0 \ll \Delta n = \Delta p \ll N_d = n_0$ (ce qui est le cas dans la plupart des expériences). Ainsi :

$$n \approx n_0 = N_d$$

$$p \approx \Delta p \ll N_d$$

Ces expressions permettent de réécrire les équations 1.61 et 1.62, en supposant qu'elles sont toujours valables :

$$E_F = E_i + k_B T \ln \left(\frac{n_0 + \Delta n}{n_i} \right) \quad (1.63)$$

$$\approx E_i + k_B T \ln \left(\frac{n_0}{n_i} \right) \quad (1.64)$$

$$E_F = E_i + k_B T \ln \left(\frac{n_i}{p + \Delta p} \right) \quad (1.65)$$

$$\approx E_i + k_B T \ln \left(\frac{n_i}{\Delta p} \right) \quad (1.66)$$

La première équation montre que le niveau de Fermi n'est pas modifié par rapport à la situation de l'équilibre : $E_F = E_{F0}$ (la densité d'électrons n'ayant pas changée, le niveau de Fermi reste constant).

La seconde équation montre, puisque $\Delta p \gg p_0$, que $E_F < E_{F0}$: la densité de trous ayant fortement augmentée par rapport à l'équilibre, le niveau de Fermi se rapproche de la bande de valence.

Que faut-il alors considérer : le niveau de Fermi de l'équilibre (lorsqu'on raisonne avec les électrons) ou une diminution de celui-ci (lorsqu'on raisonne sur les trous) ? Le niveau de Fermi, qui nous était très utile, semble donc impossible à utiliser lorsque la situation s'éloigne de l'équilibre thermodynamique.

Formalisme des quasi-niveaux de Fermi

Pour remédier au problème précédent, faisant apparaître une contradiction, une solution consiste à considérer deux niveaux de Fermi distincts, appelés **quasi-niveaux de Fermi**, associés chacun à un type de porteur :

- on associe aux électrons un quasi-niveau de Fermi E_{Fn} , défini par la relation ¹⁸ suivante, valable hors équilibre :

$$n = n_i \exp(-(E_i - E_{Fn})/k_B T) \quad (1.67)$$

Ce quasi-niveau de Fermi reflète la densité d'électrons hors équilibre.

- on associe aux trous un quasi-niveau de Fermi E_{Fp} , défini par la relation ¹⁹ suivante, valable hors équilibre :

$$p = n_i \exp((E_i - E_{Fp})/k_B T) \quad (1.68)$$

Ce quasi-niveau de Fermi reflète la densité de trous hors équilibre.

Avec ces définitions, les équations 1.61 et 1.62 s'écrivent, hors équilibre :

$$E_{Fn} = E_i + k_B T \ln\left(\frac{n_0}{n_i}\right) \quad (1.69)$$

$$E_{Fp} = E_i + k_B T \ln\left(\frac{n_i}{\Delta p}\right) \quad (1.70)$$

Ainsi, on conclut que le quasi-niveau de Fermi E_{Fn} est identique au niveau de Fermi de l'équilibre : $E_{Fn} = E_{F0}$, tandis que le quasi-niveau de Fermi E_{Fp} diminue par rapport au niveau de Fermi de l'équilibre : $E_{Fp} < E_{F0}$. Les deux quasi-niveaux de Fermi étant des niveaux différents (ayant une signification propre à chaque type de porteur), ces équations ne sont plus contradictoires.

A l'équilibre, ces équations s'écrivent :

$$E_{Fn} = E_i + k_B T \ln\left(\frac{n_0}{n_i}\right) \quad (1.71)$$

$$E_{Fp} = E_i + k_B T \ln\left(\frac{n_i}{p_0}\right) \quad (1.72)$$

Compte-tenu du fait que $p_0 \times n_0 = n_i^2$, les deux membres de droite sont donc identiques : $E_{Fn} = E_{Fp}$.

Ainsi, le niveau de Fermi (unique à l'équilibre) se sépare en deux quasi-niveaux de Fermi hors équilibre, rendant compte des évolutions des deux types de porteur.

Longueur de diffusion des porteurs minoritaires

Considérons par exemple un semiconducteur de type N, de longueur L dont la densité d'atomes donneurs vaut N_d . Notons n_0 et p_0 les densités d'électrons et de trous à l'équilibre thermodynamique. On a alors les relations suivantes :

$$n_0 = N_d$$

$$p_0 = n_i^2/N_d$$

¹⁸une relation analogue aux équations 1.15 peut également définir ce quasi-niveau de Fermi

¹⁹une relation analogue aux équations 1.15 peut également définir ce quasi-niveau de Fermi

Supposons que l'on crée des paires électrons/trous uniquement en $x = 0$ (par éclairage par exemple), le taux de génération de porteurs étant alors nul pour $x > 0$. Plaçons-nous sous l'hypothèse de faible injection : les porteurs majoritaires ne sont pas affectés par cette variation.

Les porteurs minoritaires sont en excès par rapport à l'équilibre en $x = 0$. Ils vont donc diffuser vers les x croissants²⁰. Nous allons déterminer la variation Δp des porteurs minoritaires dans le semiconducteur, par rapport à l'équilibre. Appliquons l'équation de continuité des trous en régime stationnaire :

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \operatorname{div} \vec{j}_p + g_p - r_p$$

avec :

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial t} = 0 & \quad : \quad \text{car on est en régime stationnaire,} \\ \vec{j}_p = -qD_p \frac{d\Delta p}{dx} & \quad : \quad \text{seule la composante de diffusion est non nulle (pas de} \\ & \quad \text{champ),} \\ g_p = 0 & \quad : \quad \text{pour } x > 0 \text{ par hypothèse,} \\ r_p = \Delta p / \tau_p & \quad : \quad \text{car ce sont des porteurs minoritaires} \end{aligned}$$

On aboutit donc à une équation différentielle du second ordre :

$$\frac{d^2 \Delta p}{dx^2} - \frac{1}{D_p \tau_p} \Delta p = 0 \quad (1.73)$$

Posons $L_p = \sqrt{D_p \tau_p}$, paramètre qui est homogène à une longueur (d'après l'équation précédente ou en effectuant une analyse dimensionnelle). Les solutions de cette équation se mettent sous la forme :

$$\Delta p = A e^{-x/L_p} + B e^{x/L_p}$$

Si la longueur de l'échantillon est grande devant L_p , la seconde exponentielle tend vers l'infini quand $x \rightarrow L$, ce qui n'est pas physiquement acceptable (on ne peut pas créer des porteurs à l'infini, dans une zone où il n'y a pas de génération). Il faut donc que $B = 0$. D'où la solution :

$$\Delta p(x) = \Delta p(0) e^{-x/L_p} \quad (1.74)$$

L_p est la longueur caractéristique de la diffusion des porteurs minoritaires, et s'appelle **longueur de diffusion des trous**. C'est une donnée qui dépend du matériau et du type de porteur considéré. Au bout d'une longueur égale à quelques L_p , la densité de porteurs minoritaires redevient égale à la valeur de l'équilibre (l'exponentielle tendant vers 0).

Remarque : plus la durée de vie des porteurs est grande, et plus la longueur de diffusion est grande (les porteurs minoritaires se recombinant moins, ils peuvent diffuser sur une plus grande distance). Le même raisonnement peut être tenu en considérant la constante de diffusion.

Une étude analogue peut être menée avec les électrons. Cette notion de longueur de diffusion des porteurs minoritaires est importante car dans la plupart des composants les dimensions sont fixés vis à vis de ce paramètre.

²⁰nous négligerons le champ induit par la diffusion.

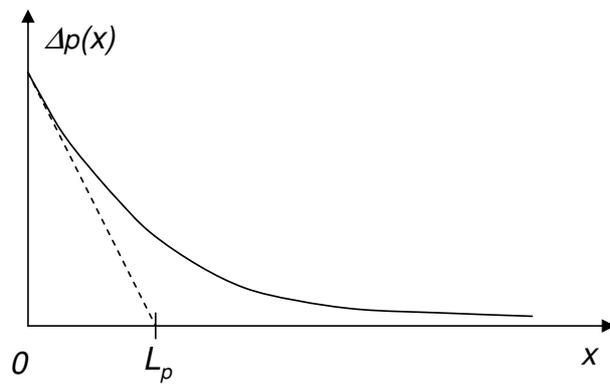


FIG. 1.14 – Variation de l'excès de trous (porteurs minoritaires) dans un semiconducteur de longue dimension, soumis à une génération de porteurs en $x = 0$.